

УДК 004.4

doi:10.20998/2413-4295.2017.53.06

**РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ  
МІКРОСТРУКТУРИ МЕТАЛІВ МЕТОДОМ КЛІТКОВИХ АВТОМАТІВ****О. Д. ПАНАРИНА\*, О. О. ВОДКА**

кафедра ДММ, НТУ «ХПІ», Харків, УКРАЇНА

\* email: alesyapanarina1@gmail.com

**АНОТАЦІЯ** Мікроструктура металів є дуже складною, це спричинено тим, що вони кристалізуються одразу із декількох центрів. З огляду на це необхідно вміти моделювати мікроструктуру металів, що може дати можливість передбачити поведінку металів при прикладенні до них різного роду зовнішнього навантаження. Метою роботи є розробка програмного забезпечення для штучного моделювання мікроструктури методом кліткових автоматів та порівняння результатів із уже відомими. У процесі роботи були розглянуті методи штучного відтворення мікроструктури металів, вивчено метод кліткових автоматів, розроблено програмне забезпечення, що дозволяє моделювати мікроструктури металів по заданим випадковим чином центрам зерен. Програмне забезпечення було протестовано та порівняно результати, отримані методом кліткових автоматів та методом Воронного. В результаті було розроблено програмне забезпечення для моделювання форми кристалів методом кліткових автоматів, отримані результати були перевірені на достовірність.

**Ключові слова:** мікроструктура металів; штучне відтворення мікроструктури; метод кліткових автоматів; програмне забезпечення; моделювання мікроструктури.

**SOFTWARE DEVELOPMENT FOR SIMULATION OF THE MICROSTRUCTURE OF  
MATERIALS BY MEANS OF CELLULAR AUTOMATA****O. D. PANARINA, O. O. VODKA**

Department of DPM, NTU "KHPI", Kharkov, UKRAINE

**ABSTRACT** Microstructure of metals is very complex, this is because they kristallizuetsya from several centers. Given this, you should be able to simulate the microstructure of metals that can give the possibility to predict the behavior of metals when under different kinds of external loads. The aim of this work is to develop software for artificial simulation of the microstructure by the method of cellular automata and comparing the results with known ones. In the process, were considered methods of artificial reproduction of the microstructure of metals, studied by the method of cellular automata, developed software for simulating microstructure of metals according to given randomly to the centers of the grains. The software has been tested and compared results obtained by the method of cellular automata and the method Voronogo. The result was the software developed for modelling the shape of the crystals by the method of cellular automata, the obtained results were checked for accuracy.

**Keywords:** microstructure of metals; an artificial reconstruction of a microstructure; the method of cellular automata; software; modeling of microstructure.

**Вступ**

Реальні метали, що використовуються у техніці, зазвичай не являються чистими, а є сплавами, вони складаються з великої кількості зерен, орієнтація яких є випадковою, а самі зерна містять атоми різних компонент. Причиною зернистої будови металів і сплавів є те, що вони кристалізуються відразу з декількох центрів, що призводить до їх складної мікроструктури[1].

Беручи до уваги те, що мікроструктура є достатньо складною, необхідно моделювати форми кристалів, що може дати можливість передбачити поведінку металів при прикладенні до них різного роду зовнішнього навантаження[2].

Для моделювання виділяється декілька методів штучного відтворення мікроструктури металів: тесцеляція Вороного, принцип клітинних автоматів, метод Монте-Карло.

Найбільш простим методом моделювання є метод кліткових автоматів. Саме цей метод було розглянуто в роботі.

**Мета роботи**

Метою роботи є розробка програмного забезпечення для штучного моделювання мікроструктури методом кліткових автоматів. Для досягнення поставленої мети у роботі ставилися такі завдання:

- Розглянути методи штучного відтворення мікроструктури металів;
- Вивчити метод кліткових автоматів моделювання мікроструктур;
- Розробити програмне забезпечення (ПЗ) що дозволяє моделювати мікроструктури металів по заданим випадковим чином центрам зерен;
- Протестувати роботу ПЗ, та порівняти результати із уже відомими результатами, отриманими іншими методами моделювання мікроструктур.

**Виклад основного матеріалу**

Термін «кліткові автомати» почав використовуватись у середині ХХ ст. для позначення

сукупності залежних елементів з заданими станами і правил, згідно з якими стани цих елементів і залежності між ними змінюються в часі. Час і стани при цьому дискретні. Використання описаних моделей для формального моделювання самовідтворюваних організмів вперше запропоновано в роботі Фон Неймана[3]. Елементи кліткових автоматів запропоновано представити одновимірними або двовимірними нескінченними прямокутними таблицями. Стан елемента змінюється в залежності від його стану і від стану двох (або чотирьох - для двовимірного випадку) найближчих сусідів.

Клітковий автомат - дискретна модель, що вивчається в математиці, теорії обчислюваності, фізики, теоретичної біології і мікромеханіці. Включає регулярну сітку клітинок, кожна з яких може перебувати в одному з станів скінченної множини, таких як 1 і 0. Решітка може бути будь-якої розмірності. Для кожної клітинки визначено безліч клітинок, які називаються околицею. Приміром, околиця може бути визначена як всі клітинки на відстані не більше 2 від поточної (околиця фон Неймана рангу 2). Для роботи клітинного автомата потрібно задання початкового стану всіх клітинок, і правил переходу клітинок з одного стану в інший. На кожній ітерації, використовуючи правила переходу і стану сусідніх комірок, визначається новий стан кожної клітинки. Зазвичай правила переходу однакові для всіх клітинок і застосовуються відразу до всієї решітки.

Існує декілька методів штучного створення мікроструктур. Серед таких методів виділяються такі:

тесцеляція Воронного, метод кліткових автоматів, метод Монте-Карло[4].

Тесцеляція Воронного є одним із перших підходів, привчених генерації мікроструктур для подальшого чисельного моделювання. Ідея методу основана на дослідження області багатокутників  $P=\{p_1, \dots, p_n\}$ , які генеруються навкруги множини початкових точок  $S=\{s_1, \dots, s_n\}$ . Кожен багатокутник зв'язаний тільки з однією точкою. При генерації цифрової мікроструктури, реалізованої за допомогою методу Воронного, передбачається, що всі точки з  $S$  представляють собою ядро зерен, у той час, коли усі багатокутники з  $P$  є площею зерен.

Метод кліткових автоматів буде описано далі в розділі 2.

Ідея методу Монте-Карло полягає у тому, що на першому кроці відбувається генерація вхідних даних, що описують початковий стан матеріалу у виді дво- або трьохмірної матриці клітинок Монте-Карло. Кожна клітинка представлена випадковим станом  $Q$ . На другому етапі дискретизується обчислювальний простір для обчислення енергії сусідніх клітинок. Далі досліджувані клітинки зазнають зміни стану  $Q$ . Після зміни стану, енергія клітинки у теперішній час перераховується. Якщо енергія клітинки зменшилася, новий стан приймається. Якщо не зменшилася, то новий стан відкидається.

Приклади мікроструктур, отриманими всіма трьома методами можна побачити на рис. 1, рис. 2, рис. 3 [4].



Рис.1- Метод тесцеляції Воронного[4]



Рис.2 – Метод кліткових автоматів[4]

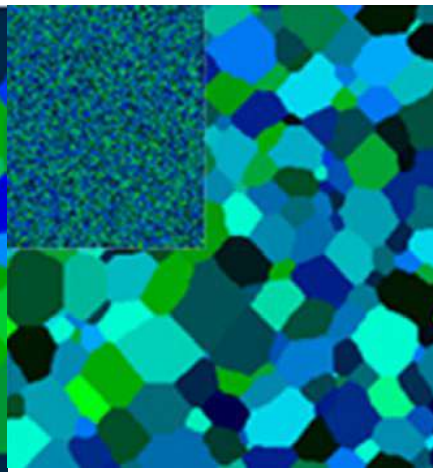


Рис.3 – Метод Монте-Карло[4]

Існує два типи околів точки: Мура та фон Неймана [5]. В околі Мура клітинки вражаються сусідами коли вони мають спільну сторону або вершину. Тобто кожна клітинка має 8 сусідів. В околі фон Неймана сусідами клітинки є тільки ті клітинки, які мають із цією клітинкою спільну сторону, тобто в локальному околі цієї клітинки є чотири клітинки.

#### Розробка програмного забезпечення

Виходячи з поставленої мети, було розроблено програмне забезпечення, яке дозволяє моделювати мікроструктури металів по заданим випадковим чином центрам зерен.

Метод кліткових автоматів широко використовується в моделюванні мікроструктури

металів. На першому кроці алгоритму росту зерна формується деякий дискретний простір кліткового автомату, який складається з клітинок кліткового автомату (рис. 4).

На наступному етапі випадковим чином обирається набір початкових клітинок, а далі змінна стану, що описує стан клітинок, встановлюється в «вже виросли». Ці клітинки представляють собою ядро зерна (рис. 5).

Другий крок алгоритму оснований на рості зерна. Правило переходу на цьому етапі визначається

так: коли сусід конкретної клітинки на попередньому кроці знаходився у стані «вже виросли», то ця клітинка може також змінити свій стан в «вже виросли» (рис.6).

Зерна можуть рости в усіх напрямках до тих пір, поки він не зустріне з іншим зерном. Після цього ріст продовжується тільки у тих напрямках, де ще немає зерен. Цей процес виконується до тих пір, поки досліджуваний простір не заповнюється зернами (рис. 7) [3].

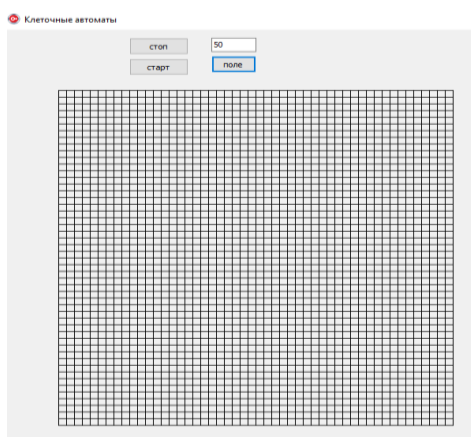


Рис. 4 – Дискретний простір кліткового автомату

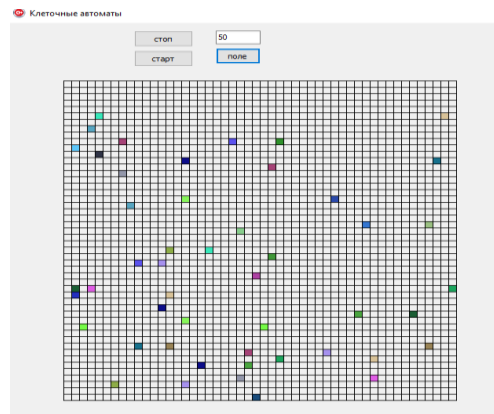


Рис.5 – Набір початкових клітинок

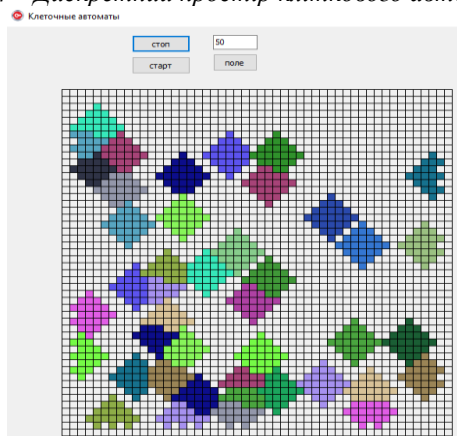


Рис.6 – Процес росту зерна

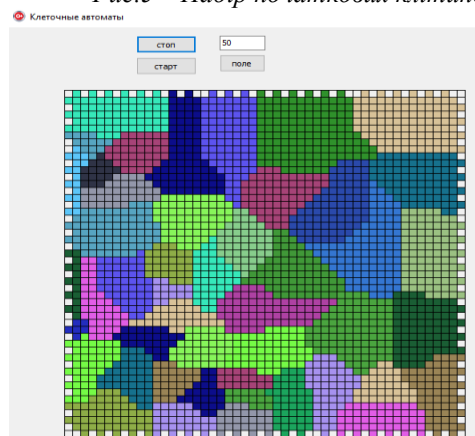


Рис.7 – Результат розростання зерен

### Обговорення результатів

У ході розробки програмного забезпечення було розглянуто декілька правил переходу. Зокрема розглядалися два види околів точки: окол фон Неймана (рис.8) та окол Мура (рис.9) першого рангів.

Також були розглянуті такі ситуації, коли зерна ростуть з різною швидкістю у різних напрямках: вдвічі швидше по x ніж по y (рис.10) та вдвічі швидше по y ніж по x(рис.11) при цьому точки мають окол фон Неймана, а також вдвічі швидше по x ніж по y (рис.12) та вдвічі швидше по y ніж по x(рис.13) при цьому точки мають окол Мура.

На рис.14 можемо спостерігати ситуацію, коли усі точки мають різні правила переходу.

Усі результати представлені при однакових центрах зерен.

Тестування розробленого програмного забезпечення проводилося методом порівняння результатів, отриманих методом кліткових автоматів, де точка мала окол фон Неймана (рис.15), та уже відомих результатів, отриманих методом Воронного (рис.16).

Як можна побачити на рисунках, результати, отримані за допомогою розробленого програмного забезпечення методом кліткових автоматів, та результати, отримані методом Воронного є дуже подібними, що може свідчити про те, що результати розробленого ПЗ можна вважати істинними.

Похибка в результатах може бути спричинена тим, що в методі кліткових автоматів границі клітинок є дискретними.

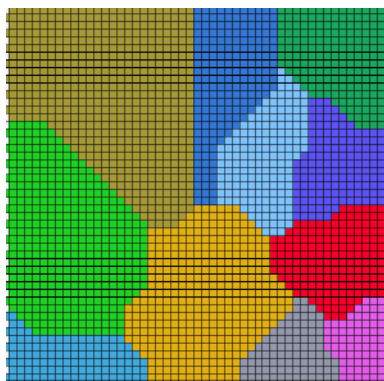


Рис. 8 – окіл фон Неймана

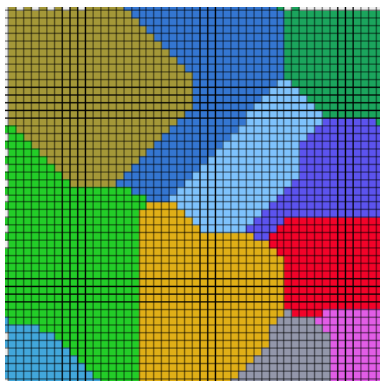


Рис.9 – окіл Мура

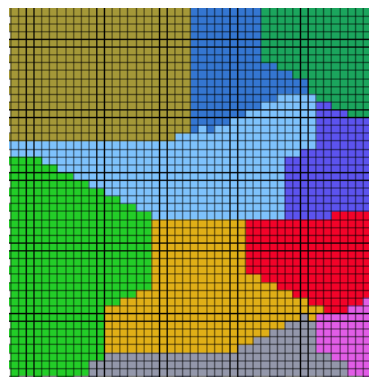


Рис.10 – Швидше по  $x$  ніж по  $y$ ,  
окіл фон Неймана

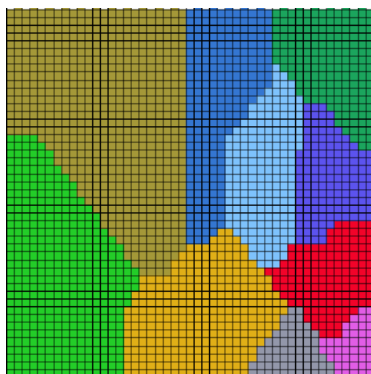


Рис.11 – Швидше по  $y$  ніж по  $x$   
окіл фон Неймана

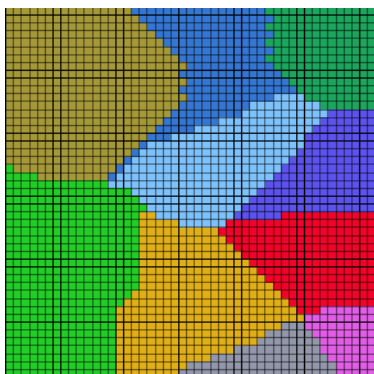


Рис.12 – Швидше по  $x$  ніж по  $y$   
окіл Мура

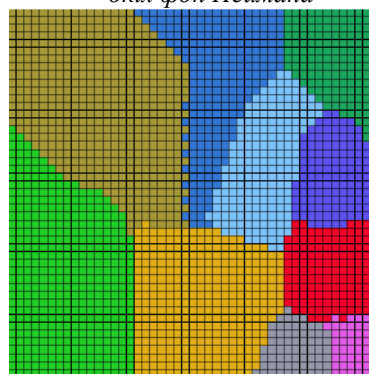


Рис.13 – Швидше по  $y$  ніж по  $x$   
окіл Мура

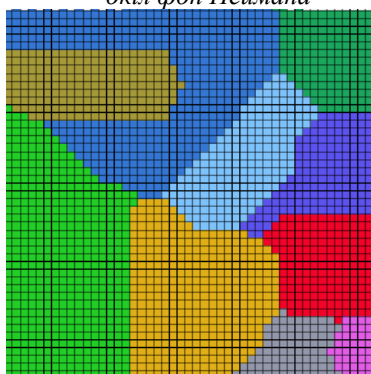


Рис.14 – Околі випадкові

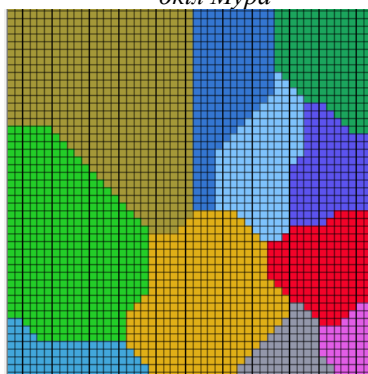


Рис.15 – Результат, отриманий  
методом кліткових автоматів

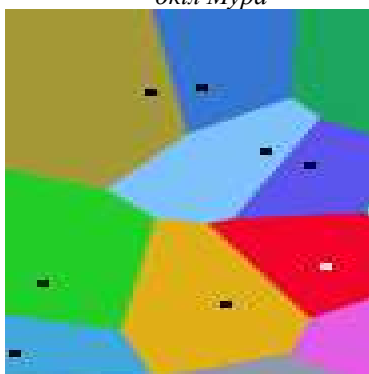


Рис.16 – Результат, отриманий  
методом Воронного

### Висновки

Для розробки програмного забезпечення було вивчена література з методами штучного відтворення мікроструктур металів. Виходячи з вивченої літератури був обраний метод кліткових автоматів.

В результаті, виходячи з поставленої мети, було розроблено програмне забезпечення для штучного відтворення мікроструктури металу методом кліткових автоматів. Отримані результати були порівняні із уже відомими результатами, отриманими методом Воронного.

Виходячи з поставленої задачі було виконано:

- Розглянуто методи штучного відтворення мікроструктури металів;

- Вивчено метод кліткових автоматів моделювання мікроструктур;

- Розроблено програмне забезпечення (ПЗ) що дозволяє моделювати мікроструктури металів по заданим випадковим чином центрам зерен;

- Протестувано роботу ПЗ, та порівняно результати із уже відомими результатами, отриманими іншими методами моделювання мікроструктур.

### Список літератури

1. Захарчук, И. И. О сложности одномерных универсальных клеточных автоматов – Дискретный анализ и исследование операций, 2002. – серия 1. том 9, № 4, 50-56.

2. **Svyetlichnyy, D. S.** Modeling of grain refinement by cellular automata / **D. S. Svyetlichnyy.** - Krakow, Poland, 2013.
3. **Дж. фон Нейман.** Теория самовоспроизводящихся автоматов / **Дж. фон Нейман.** — М.: Мир, 1971.
4. **Madej, L.** Digital/virtual microstructures in application to metals engineering / **L. Madej.** — Krakow, Poland, 2017.
5. **Тюффоли, Т.** Машины клеточных автоматов / **Т. Тюффоли, Н. Марголюс.** — М.: Мир, 1991.
6. **Наумов, Л.** «Клеточные автоматы. Реализация и эксперименты» / **Л. Наумов, А. Шалыто.**
7. **Rauch, L.** Development of the cellular automata framework dedicated for metallic materials microstructure evolution models / **L. Rauch, L. Madej, P. Spythowski, R. Golab.** — Krakow, Poland, 2015.
8. **Wolfram, S.** A New Kind of Science. - Wolfram Media, 2002 (<http://www.wolframscience.com/nksonline/toc.html>).
9. **Kühbach, M.,** A statistical ensemble cellular automaton microstructure model for primary recrystallization / **M. Kühbach, G. Gottstein, L. A. Barrales-Mora.** — Aachen, Germany, 2016.
10. **Svetlichnyy, D. S.** Modelling of the microstructure: From classical cellular automata approach to the frontal one / **D. S. Svetlichnyy.** - Krakow, Poland, 2015.

**Bibliography (transliterated)**

1. **Zaharchuk, I. I.** O slozhnosti odnomernykh universal'nykh kletochnykh avtomatov — Diskretnyj analiz i issledovanie operacij, 2002. seriya 1, 9, № 4, 50-56.
2. **Svyetlichnyy, D. S.** Modeling of grain refinement by cellular automata. - Krakow, Poland, 2013.
3. **Dzh. fon Nejman.** Teoriya samovosproizvodyashchih avtomatov. - M.: Mir, 1971.
4. **Madej L.** Digital/virtual microstructures in application to metals engineering. — Krakow, Poland, 2017.
5. **Toffoli, T., Margolus, N.** Mashiny kletochnykh avtomatov — M.:Mir, 1991.
6. **Naumov, L., Shalyto, A.** «Kletochnye avtomaty. Realizatsiya i ehksperimenty».
7. **Rauch L., Madej, L., Spythowski, P., Golab, R.** Development of the cellular automata framework dedicated for metallic materials microstructure evolution models. — Krakow, Poland, 2015.
8. **Wolfram, S.** A New Kind of Science — Wolfram Media, 2002 (<http://www.wolframscience.com/nksonline/toc.html>).
9. **Kühbach, M., Gottstein, G., Barrales-Mora, L. A.** A statistical ensemble cellular automaton microstructure model for primary recrystallization. — Aachen, Germany, 2016.
10. **Svetlichnyy, D. S.** Modelling of the microstructure: From classical cellular automata approach to the frontal one. - Krakow, Poland, 2015.

**Відомості про авторів (About authors)**

**Панаріна Олесь Дмитрівна** – студент, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», студент кафедри динаміки та міцності машин; м. Харків, Україна; e-mail: alesyapanarina@mail.ru.

**Olesya Panarina** – student, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", student of the Department of dynamics and strength of machines; Kharkiv, Ukraine; e-mail: alesyapanarina@mail.ru.

**Водка Олексій Олександрович** – доцент кафедри Динаміки та міцності машин, кандидат технічних наук Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»; м. Харків, Україна; e-mail: oleksii.vodka@gmail.com.

**Alexey Vodka** – associate Professor of the Department of Dynamics and strength of machines, candidate of technical Sciences national technical University "Kharkiv Polytechnic Institute"; PhD Kharkov, Ukraine; e-mail: oleksii.vodka@gmail.com.

*Будь ласка, посилайтесь на цю статтю наступним чином:*

**Панаріна, О. Д.** Розробка програмного забезпечення для моделювання мікроструктури металів методом кліткових автоматів / **О. Д. Панаріна, О. О. Водка.** – Харків: НТУ «ХПІ». – 2017. – № 53 (1274). – С. 40-44. – doi:10.20998/2413-4295.2017.53.06

*Please cite this article as:*

**Panarina, O. D., Vodka, A. A.** Software Development for simulation of the microstructure of metals by the method of cellular automata. *Bulletin of NTU "KhPI". Series: New solutions in modern technologies.* – Kharkiv: NTU "KhPI", 2017, **53** (1274), 40–44, doi:10.20998/2413-4295.2017.53.06.

*Пожалуйста, ссылайтесь на эту статью следующим образом:*

**Панарина, О. Д.** Разработка программного обеспечения для моделирования микроструктуры металлов методом клеточных автоматов / **О. Д. Панарина, А. А. Водка,** – Харьков: НТУ «ХПИ». – 2017. – № 53 (1274). – С. 40-44. – doi:10.20998/2413-4295.2017.53.06.

**АНОТАЦІЯ** Микроструктура металів є дуже складною, це викликане тим, що вони кристалізуються зразу з декількох центрів. Ураховуючи це, необхідно вміти моделювати микроструктуру металів, що може дати можливість передбачити поведінку металів при прикладенні до них різного роду зовнішньої навантаження. Метою роботи є розробка програмного забезпечення для штучного моделювання микроструктури методом кліткових автоматів і порівняння результатів з уже відомими. В процесі роботи були розглянуті методи штучного виробництва микроструктури металів, вивчено метод кліткових автоматів, розроблено програмне забезпечення, що дозволяє моделювати микроструктуру металів за заданим випадковим образом центрів зерен. Програмне забезпечення було протестовано і порівняні результати, отримані методом кліткових автоматів і методом Воронного. В результаті було розроблено програмне забезпечення для моделювання форми кристалів методом кліткових автоматів, отримані результати були перевірені на достовірність.  
**Ключові слова:** микроструктура металів; штучне відтворення микроструктури; метод кліткових автоматів; програмне забезпечення; моделювання микроструктури.

*Поступила (received) 19.12.2017*